

Әр тақырыпта бір есеп, берілгендері, қолданылатын формулалар, қадамдық шешуі және физикалық түсіндірмесі берілген. Есептер молекулалық спектроскопия, ИҚ және Раман спектроскопиясы бойынша стандартты теориялық қатынастарға негізделген.

Негізгі тұрақтылар: $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J s}$, $N_A = 6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

15-тақырып. Заттарды ИҚ және Раман спектрлері бойынша идентификациялау

Есеп 15. Белгісіз органикалық заттың функционалдық тобын анықтау

Есеп шарты. Белгісіз сұйықтың ИҚ спектрінде мына негізгі жолақтар байқалды: 1715 cm^{-1} - өте күшті; $2850 - 2960 \text{ cm}^{-1}$ - бірнеше жолақ; $3200 - 3600 \text{ cm}^{-1}$ аймағында кең О-Н жолағы жоқ; $2100 - 2260 \text{ cm}^{-1}$ аймағында жолақ жоқ. Затта қандай негізгі функционалдық топ болуы ықтимал?

Шешуі. Бірінші қадам - ең диагностикалық күшті жолақты талдау. 1715 cm^{-1} аймағындағы күшті жұтылу көбіне карбонилдік $\text{C}=\text{O}$ созылуына тән.

Екінші қадам - О-Н аймағын тексеру. $3200 - 3600 \text{ cm}^{-1}$ кең жолағының болмауы спирттік немесе фенолдық О-Н тобын қолдамайды. Карбон қышқылдары үшін тән өте кең $2500 - 3300 \text{ cm}^{-1}$ жолағы да шартта көрсетілмеген.

Үшінші қадам - $2850 - 2960 \text{ cm}^{-1}$ жолақтары қаныққан алифаттық С-Н байланыстарына сәйкес келеді.

Төртінші қадам - $2100 - 2260 \text{ cm}^{-1}$ аймағында жолақтың болмауы $\text{C}\equiv\text{C}$ немесе $\text{C}\equiv\text{N}$ топтарының айқын белгісін жоққа шығарады.

Қорытынды. Берілген мәліметтер алифаттық карбонилді қосылысқа сәйкес келеді. Егер альдегидке тән шамамен 2720 және 2820 cm^{-1} әлсіз қос жолақ та болмаса, кетон ықтималдығы жоғары болады.

Жауабы: негізгі функционалдық топ - карбонил $\text{C}=\text{O}$; қосымша деректер болмаған жағдайда затты кетон немесе басқа карбонилді қосылыс ретінде қарастыру керек. Бір ғана жолақ бойынша нақты зат атауын белгілеуге болмайды; «саусақ ізі» аймағын эталон спектрмен салыстыру қажет.